

Autoensamblado de Nanopartículas en Interfases Blandas

Salamone, Agustín¹; Del Pópolo, Mario¹; Longo, Gabriel²

¹ Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (ICB-CONICET-UNCuyo), Mendoza, Argentina

² Instituto de Investigaciones Físico-Químicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA-CONICET-UNLP), La Plata, Argentina

agustin-salamone@hotmail.com

Área temática: B. Autoensamblado

La interfase entre dos soluciones electrolíticas inmiscibles (ITIES) constituye un entorno ideal para el autoensamblado de superestructuras bidimensionales de nanopartículas con propiedades funcionales ajustables [1,2]. En estos sistemas, la aplicación de una diferencia de potencial entre las fases permite modular la acumulación interfacial de especies cargadas, dando lugar a superestructuras cuya estabilidad y organización dependen de manera sensible de las condiciones fisicoquímicas. Comprender los mecanismos moleculares que gobiernan la formación y estabilidad de estas estructuras es clave para el diseño racional de nanomateriales basados en interfases blandas.

En este trabajo se presenta un estudio teórico-computacional orientado a caracterizar monocapas y multicapas de nanopartículas ensambladas en ITIES. La metodología se basa en Teoría Molecular [3], que describe de manera consistente las contribuciones entrópicas y energéticas a la energía libre del sistema, incluyendo interacciones electrostáticas, estéricas y de van der Waals, así como el equilibrio ácido-base de grupos ionizables. A partir de la minimización de un funcional de energía libre se obtienen perfiles de densidad de nanopartículas, potenciales de fuerza media y magnitudes termodinámicas que permiten identificar las configuraciones más estables. Se analizan las condiciones bajo las cuales emergen arreglos interfaciales en forma de monocapas y multicapas, en función de parámetros como la concentración de sal, el pH y el potencial aplicado. En particular, se calculan isothermas de adsorción y curvas de capacitancia-potencial, estableciendo vínculos directos entre la estructura interfacial y observables electroquímicos, y contribuyendo a una descripción molecular del autoensamblado de nanopartículas en interfases líquido-líquido polarizadas.

REFERENCIAS

1. Zaldivar, G.; Perez Sirkin, Y. A.; Debais, G.; Fiora, M.; Missoni, L. L.; Gonzalez Solveyra, E.; Tagliacruzchi, M. *ACS Omega* 7 (2022) 38109–38121
2. Edel, J. B.; Ma, Y.; Kornyshev, A. A. *Nanophotonics* 12(2023) 2717–2744
3. Chiarpotti, M. V.; Galassi, V. V.; Longo, G. S.; Del Pópolo, M. G. *J. Phys. Chem. B* 128 (2024) 4396–4403